多変数関数の極値を求める2〜3の方法の比較 : 制約条件のない場合(科学計算基本ライブラリーのアルゴリズム)

数理解析研究所講究録
115巻 1971年 118-130

多変数関数の極値を求める2〜3の方法の比較
—制約条件のない場合—

戸田英雄(ETL),高山文雄(ETL)
高沢嘉光(東大工)

1. まえがき

多変数関数の極値を求める問題(あるいは連立の非線型方程式を解く問題)のアプローチは,よく知られているが,二つの段階に分けられる:

第1段階は,第1近似を概測すること

第2段階は,第1近似の解の精度を更によくすること

で第1段の一般的な解法はない。第2段は一般的な方法が種々あって,すでにS.S.P.などで使用できる。

ここでは,非常に簡単なテスト用の問題と,筆者が最近試みたある連立型の非線型方程式(Belaga, Pan [4] による多項式の新しい計算式を作るための方程式)を解くことについて,2〜3の極値を求める方法の比較を述べる。いずれも制約条件のない場合である。

2．極値を求める種々な方法（制約条件のない場合）

第2次の解法で試みた方法を述べる。テスト用の簡単な問題として次のものを用いた。

$$F(x_1, x_2) = (6x_1+6x_2-5)^4 + (6x_1-6x_2-1)^2 + (2x_1-1)^2 \cdot (3x_2-1)^2$$

の極値を与える (x_1, x_2) をもとめよ。ただし $-1 < x_1, x_2 < 1$ の範囲である。

$F(x_1, x_2)$ の曲面を表す図は高沢がカーブプロッタで描いたものである。

（解法－1）座標軸 x_k に平行にある規則で降下していく方法

[手順] i) 収束判定用の EPS と刻み巾 h を決める。第1近似 $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$ をあたえて $F(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = F_{min}$ とする。

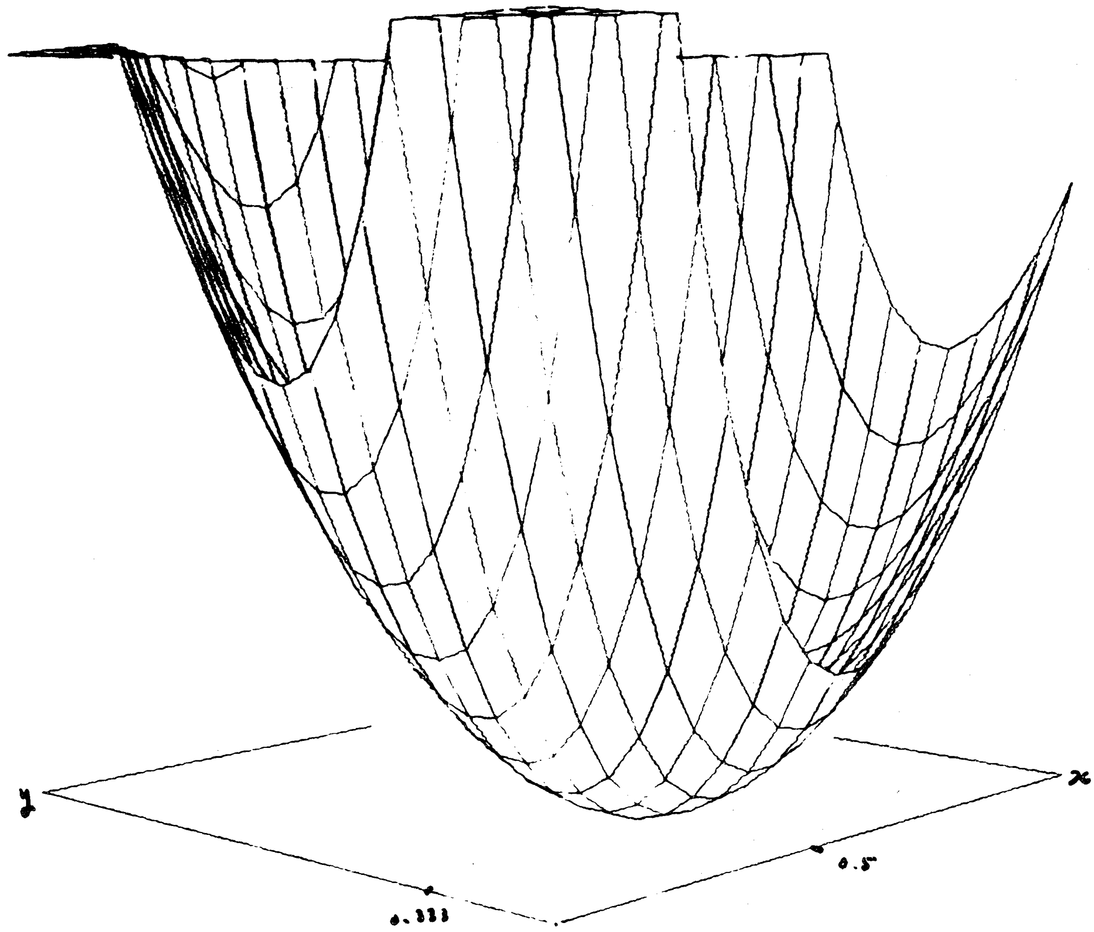
ii) x_1 軸上を刻み巾で $x_1 := x_1 + h$ を繰返して F_{min} の値をもとめる。

iii) x_2 軸上で同様に $x_2 := x_2 + h$ を繰返して F_{min} の値をもとめる

iv) ii) と iii) を繰返して F_{min} の値が動かなくなったとき $h := h/2$ とする

v) $|h| \le EPS$ ならやめる。$|h| > EPS$ のときは ii) に戻る。

20



（解法－２）　3^n型実験計画法

山登り法とは通称で（收率の山に登る話），Box-Wilsonが応答曲面の探検に利用したものである．これはいわゆる最適条件を求めるための逐次実験計画法で，品質管理（1956）PP.431～435に森口氏がこの解説と批判を行い，最後に一つの案を与えている．それによると，最初から3^n型で２次曲面をあてはめその中心に向って進む方法である．

$n=2$の場合では，ある点のまわりに，3^2-1個の観測点をおいて，２次曲面を

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11}(3x_1^2 - 2) + \beta_{22}(3x_2^2 - 2) + \beta_{12} x_1 x_2$$

であてはめ，$\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_{12}$を最小二乗法のやり方で推定する．データの構造が直交性のある計画となっているので，正規方程式は簡単にとけて，推定された２次曲面の中心は，

$$\begin{bmatrix} 6\beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{12} & 6\beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\beta_1 \\ -\beta_2 \end{bmatrix}$$

をといて$\{x_1, x_2\}$から求められる．はじめ，ある点を$\{c_1, c_2\}$を任意の中心とすれば，次の中心は

$$c_1 + x_1 \to c_1 \quad , \quad c_2 + x_2 \to c_2$$

となる．$h \to h/2$として繰返す．

（解法-3） Newton-Raphson 法

関数 $F(X)$ が連続微分可能で，極値 X_{min} の第 n 近似を $X^{(n)}$ とする．

$$X_{min} = X^{(n)} + \delta \tag{3-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F(X)\Big]_{X=X_{min}} = 0 \tag{3-2}$$

(3-2) を $X^{(n)}$ のまわりにテーラ展開し δ^2 のオーダを省略すると，

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F(X)\Big]_{X=X^{(n)}} + \sum_{j=1}^{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} F(X)\Big]_{X=X^{(n)}} \cdot \delta_j \fallingdotseq 0 \tag{3-3}$$

ここで， $g_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} F(X)\Big|_{X=X^{(n)}}$ ， $G_{ij} \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} F(X)\Big]_{X=X^{(n)}}$

$g \equiv [g_i]$ ， $G = [G_{ij}]$

とおく．G は正の定符号とする．

(3-2) は $g(X_{min}) = 0$

(3-3) は $g(X^{(n)}) \equiv g^{(n)} = G(X^{(n)} - X_{min})$

となる．ここで Newton-Raphson の反復法は，

$$X^{(n+1)} = X^{(n)} - G^{-1} \cdot g^{(n)} \tag{3-4}$$

となる．ここで $|G| \neq 0$ のとき G^{-1} をどのようにして求めるかによって，次のような解法に分れる．

（解法 3-1） G から G^{-1} を直接求める法

（解法 3-2） Fletcher, Powell (1963) の方法（FMFP法）[1]

（解法 3-3） CG法（FMCG法） [2]

簡単なテスト用の問題での比較表

	内容	関数値	1階の導関数	2階の導関数	計算結果	
解法 1	座標軸 x_k に平行に降下	要	不要	不要	.499 2	.332 5
解法 2	3^n 型実験計画法	要	不要	不要	.500 001	.333 342
解法 3−1	Newton法（直接法）	要	要	要	.499 996	.333 329
3−2	〃　（FMFP法）	要	要	不要	.500 001	.333 335
3−3	〃　（FMCG法）	要	要	不要	.500 260	.333 593

上記のような簡単な場合（$n=2$ で極値は1つしかない，極値のある範囲が知れている）にはどうやっても答は得られるが各解法の特徴を次にあげる。

解法 1	関数値だけが必要，プログラムは一番単純。
解法 2	関数値だけが必要．1に比べて精度はいいがプログラムは少しめんどう。
解法 3−1	正攻法．2階の導関数まで必要．FORMAC等の数式処理言語を併用すると便利と思われる。
3−2	SSP（IBM 360用）として用いられている。
3−3	(3−2) より精度で少し劣る場合がある。

3. ある非線型の連立方程式を解く場合の比較表

筆者は最近次のような方程式を解く必要があって，オ1近似の精度をよくするために，解法3−1，3−2，3−3で比較した結果を示す。

問題： Belaga, Pan [4] による多項式計算の新しいアルゴリズムを求める問題である；

多項式 $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$

で；$a_n, a_{n-1}, \cdots, a_1, a_0$；$x$ から $p(x)$ を計算するには

$2n-1$ 回のかけ算と n 回のたし算が必要となる。

$$p(x) = ((\cdots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})\cdots)+a_1)x + a_0$$

でやれば n 回のかけ算と n 回のたし算で出来る。しかしかけ算の回数は，どの位までへらすことが出来るか？多くの人により研究されている。その中でBelaga, Pan のアルゴリズムとして次のものがある。

$$
\boxed{
\begin{aligned}
&p_0 = x^2, \quad p_0' = p_0 + x, \quad p_1 = x + \lambda_1 \\
&\left.\begin{aligned}
&p_4^{(s)} = (p_0' + \lambda_{4s-2}) \cdot (p_0 + \lambda_{4s-1}) + \lambda_{4s} \\
&p_{4s+1} = p_{4s-3} \cdot p_4^{(s)} + \lambda_{4s+1}
\end{aligned}\right\} (s = 1, 2, \cdots, k) \\
&p_{4k+3} = p_{4k+1} \cdot (p_0 + \lambda_{4k+2}) + \lambda_{4k+3}, \\
&p(x) = \begin{cases} a_n p_n & (n = 4k+1, 4k+3) \\ a_n x\, p_{n-1} + a_0 & (n = 4k+2, 4k+4) \end{cases}
\end{aligned}
}
\tag{3-1}
$$

かけ算の回数は $\left[\frac{n+4}{2}\right]$ にへるが，たし算の回数は $n+1$ となる．たとえば $n=9$ の場合

$$p(x) = a_9 x^9 + a_8 x^8 + \cdots + a_1 x + a_0 = a_9 \left\{ x^9 + b_8 x^8 + \cdots + b_1 x + b_0 \right\}$$
$$= a_9 p_9$$

で，Belaga-Pan のアルゴリズムでは，$b_8, b_7, \cdots b_0$ からあらかじめ $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_9$ をもとめておけば，かけ算は6回，たし算は10回となる．

$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_9$ をもとめるには，次の連立方程式を解く必要がある．未知数は，$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$，$\beta_2, \beta_3, \beta_4$，$\lambda_9$ で

$$\left.\begin{array}{lllllll}
b_8 = 1 + \alpha_1 & & & & & & \\
b_7 = & \alpha_2 + & \alpha_1 + & \beta_2 & & & \\
b_6 = & \alpha_3 + & \alpha_2 + & \beta_2 \cdot \alpha_1 + & \beta_3 & & \\
b_5 = & \alpha_4 + & \alpha_3 + & \beta_2 \cdot \alpha_2 + & \beta_3 \cdot \alpha_1 + & \beta_4 & \\
b_4 = & \alpha_5 + & \alpha_4 + & \beta_2 \cdot \alpha_3 + & \beta_3 \cdot \alpha_2 + & \beta_4 \cdot \alpha_1 & \\
b_3 = & & \alpha_5 + & \beta_2 \cdot \alpha_4 + & \beta_3 \cdot \alpha_3 + & \beta_4 \cdot \alpha_2 & \\
b_2 = & & & \beta_2 \cdot \alpha_5 + & \beta_3 \cdot \alpha_4 + & \beta_4 \cdot \alpha_3 & \\
b_1 = & & & & \beta_3 \cdot \alpha_5 + & \beta_4 \cdot \alpha_4 & \\
b_0 = & & & & & \beta_4 \cdot \alpha_5 & + \lambda_9
\end{array}\right\} (3\text{-}2)$$

を解けば，$\beta_2, \beta_3\ \beta_4$ から $\lambda_6, \lambda_7, \lambda_8$ がきまり，

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ から λ_1 〜 λ_5 と $(\lambda_2+\lambda_3)$，λ_3，$(\lambda_2 \cdot \lambda_3 + \lambda_4)$

が求められる．

数値例として，$b_8=9$，$b_7=9\cdot8=9^{(2)}$，$b_6=9\cdot8\cdot7=9^{(3)}$，$\cdots b_1=9^{(8)}$，$b_0=9!$ にとり（$p(x)=e^x \doteqdot \frac{1}{9!}(x^9+b_8x^8+\cdots+b_0)$ の場合）λ_9 の近似値として高山が 16770 と求めた．

(3−2)式を $\{b_8-(1+\alpha_1)\}^2+\{b_7-(\alpha_2+\alpha_1+\beta_2)\}^2+\cdots+\{b_0-(\beta_4\cdot\alpha_8+\lambda_9)\}^2$ の極値を与える点を求める問題として，解法の(3−1)，(3−2)，(3−3)を比較した．

(3−2)式を解く			判　定
解法	3−1	Newton-Raphson法	収束した
	3−2	FMFP法	IER=1（LIMIT=30で収束しない）
	3−3	FMCG法	IER=2（リニア・サーチで収束しない）

よい第1近似から出発しないと，どの方法でもうまくいかない。(3−2)式のような問題では偏微分係数が簡単に求まるので，解法(3−1)が一番よいのは当然ではある．

数値例のOUTPUT（解法3−1）を次にのせる：

10-1

```
B8,B7,..,B0=    .90000000D+01   .72000000D+02   .50400000D+03   .30240000D+04   .15120000D+05   .60480000D+05
                .18144000D+06   .36288000D+06   .36288000D+06

K=    1
A1,A2,..,A5 =    .80000000D+01   .52273201D+02   .20479225D+03   .56742876D+03   .83636970D+03
BETA2,BETA3,BETA4 =   .11726799D+02   .15312016D+03   .41382039D+03   C=   .16769000D+05 (=λ)
F1,F2,..,F9 =    .00000000D+00   .00000000D+00  -.27755576D-16  -.22204460D-15   .00000000D+00   .30788110D-01
                -.70321924D-01  -.13462089D+01  -.41645394D+01
DA1,...,DC =     .00000000D+00  -.20092879D-04   .14875333D-05   .76240911D-03   .91438105D-02   .20092879D-04
                -.14213769D-03  -.44148910D-03   .74989230D+00

K=    2
A1,A2,..,A5 =    .80000000D+01   .52273181D+02   .20479225D+03   .56742952D+03   .83637884D+03
BETA2,BETA3,BETA4 =   .11726819D+02   .15312002D+03   .41381995D+03   C=   .16769750D+05
F1,F2,..,F9 =    .00000000D+00  -.27755576D-16  -.13877788D-15  -.40372461D-09   .28858351D-08   .23978307D-07
                 .74701651D-07  -.16362755D-05  -.40368929D-05
DA1,...,DC =     .00000000D+00  -.18346762D-09  -.35748221D-09  -.35620253D-08   .94455296D-08   .18346765D-09
                -.92679121D-09   .42986159D-08  -.34671271D-05

K=    3
A1,A2,..,A5 =    .80000000D+01   .52273181D+02   .20479225D+03   .56742952D+03   .83637884D+03
BETA2,BETA3,BETA4 =   .11726819D+02   .15312002D+03   .41381995D+03   C=   .16769750D+05
F1,F2,..,F9 =    .00000000D+00  -.13877788D-16  -.19428903D-15  -.17763568D-14  -.11102230D-13  -.51070259D-13
                -.14610535D-12  -.40945025D-12  -.15676349D-12
DA1,...,DC =     .00000000D+00  -.10148086D-16  -.12375971D-16  -.35039645D-15   .50206969D-15   .24025874D-16
                 .24606096D-16   .80537641D-15  -.72460275D-12

K=    4
A1,A2,..,A5 =    .80000000D+01   .52273181D+02   .20479225D+03   .56742952D+03   .83637884D+03
BETA2,BETA3,BETA4 =   .11726819D+02   .15312002D+03   .41381995D+03   C=   .16769750D+05
F1,F2,..,F9 =    .00000000D+00  -.20816682D-16  -.16653345D-15  -.77715612D-15  -.75495166D-14  -.43520743D-13
                -.18030022D-12  -.11413093D-12  -.14033219D-12
DA1,...,DC =     .00000000D+00   .64469083D-16   .23849582D-15   .14075174D-14  -.34711236D-15  -.43652402D-16
                 .21278777D-15  -.10453266D-14   .11582633D-11

K=    5
A1,A2,..,A5 =    .80000000D+01   .52273181D+02   .20479225D+03   .56742952D+03   .83637884D+03
BETA2,BETA3,BETA4 =   .11726819D+02   .15312002D+03   .41381995D+03   C=   .16769750D+05
F1,F2,..,F9 =    .00000000D+00  -.13877788D-16  -.16653345D-15  -.16653345D-14  -.84376950D-14  -.26201263D-13
                -.55733196D-13  -.20294877D-12  -.10169643D-12
DA1,...,DC =     .00000000D+00  -.15444973D-16  -.88385891D-16  -.38960676D-15   .31003027D-15   .29322760D-16
                 .3575[illegible]D-16   .50539576D-15  -.44930260D-12
```

(3-2) 式の $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_5$ と $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_4$ と λ の 第1近似値

第2近似

第3近似

第4近似

第5近似

10-2

BELAGE PAN METHOD

```
DOUBLE L1,L2,..,L9 =
      .7000000000000000D+01    .1573931987683246D+03   -.1121200178613870D+03
      .1899919790638705D+05   -.8629508700677522D+04   -.1413931987683246D+03
      .1531200178613870D+03    .2206394906939971D+05    .1676974988882834D+05
```

16 桁の $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_9$

```
LAM1,LAM2,...,LAM9 =    .70000000E+01    .15739320E+03   -.11212002E+03    .18999198E+05   -.86295088E+04
                     -.14139320E+03    .15312001E+03    .22063949E+05    .16769750E+05
```

8桁にまるめた $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_9$

---TEST---

```
X=  .00000000E+00  BELAGA,PAN=  .10000006E+01  ER=  .62584877E-06  NESTING=  .10000000E+01  EXP(X)=  .10000000E+01
X=  .10000000E+00  BELAGA,PAN=  .11051699E+01  ER= -.91685797E-06  NESTING=  .11051709E+01  EXP(X)=  .11051709E+01
X=  .20000000E+00  BELAGA,PAN=  .12214033E+01  ER=  .43917680E-06  NESTING=  .12214027E+01  EXP(X)=  .12214028E+01
X=  .30000000E+00  BELAGA,PAN=  .13498585E+01  ER= -.22078166E-06  NESTING=  .13498588E+01  EXP(X)=  .13498588E+01
X=  .40000000E+00  BELAGA,PAN=  .14918254E+01  ER=  .47939830E-06  NESTING=  .14918247E+01  EXP(X)=  .14918247E+01
X=  .50000000E+00  BELAGA,PAN=  .16487222E+01  ER=  .59645390E-06  NESTING=  .16487212E+01  EXP(X)=  .16487212E+01
X=  .59999999E+00  BELAGA,PAN=  .18221189E+01  ER=  .65367203E-07  NESTING=  .18221188E+01  EXP(X)=  .18221188E+01
X=  .69999999E+00  BELAGA,PAN=  .20137542E+01  ER=  .79913298E-06  NESTING=  .20137526E+01  EXP(X)=  .20137527E+01
X=  .80000000E+00  BELAGA,PAN=  .22255411E+01  ER=  .13387762E-06  NESTING=  .22255408E+01  EXP(X)=  .22255409E+01
X=  .89999999E+00  BELAGA,PAN=  .24596044E+01  ER=  .58155274E-06  NESTING=  .24596030E+01  EXP(X)=  .24596030E+01
X=  .10000000E+01  BELAGA,PAN=  .27182826E+01  ER=  .39464794E-06  NESTING=  .27182815E+01  EXP(X)=  .27182817E+01
```

4. むすび

多変数関数の極値を与える点を求める問題(制約条件のない場合)を連立型の非線型の方程式を解く問題として考えた。解の第1近似を探すのが一番大変な仕事であった。

計算機で問題を解くときの心構えとしてよく知られているが，なかなか実行が難しいことで，

1) その問題に関する理論のうちから，利用できるものは出来るだけ利用して，問題や解の性質を把握する。(各分野での理論の活用)

2) 問題や解の性質を出来るだけ活用した解法を選択することが大切である。

計算センタにあるライブラリ(SSP等)を機械的に利用してもうまく行かないことが多いのは当然で，とくに多変数関数の極値探しでは 1)，2) の必要性は大きいと思われる。

最後に，Belaga, Pan による多項式の新しい計算法等に関して種々教えを頂いた伊理正夫氏に謝礼申し上げる.

文献

[1] R. Fletcher and M.J.D. Powell, "A Rapidly convergent Descent Method for Minimization", Computer Journal, Vol. 6, (1963), PP. 163-168.

[2] R. Fletcher and C.M. Reeves, "Function minimization by conjugate gradients", Computer Journal, Vol. 7, (1964), PP. 149-154.

[3] IBM data center user's guide SSP PP. 1-9.

[4] V. Ya. Pan, "Methods of computing values of polynomials. Russian Math. Surveys, Vol. 21, PP. 105-136 (1966).

[5] L.A. Lyusternik, O.A. Chervonenkis and A.R. Yanpol'skii, Handbook for Computing Elementary Functions. Pergamon Press, 1965.

[6] 伊理正夫, 講義プリント (1970)